

Peremérték-feladatok numerikus megoldása Galjorkin-módszerekkel

Habilitációs dolgozat

Izsák Ferenc
adjunktus

Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék



Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar
2015

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
1.1. Általános rész	1
1.2. Galjorkin-módszerekkel kapcsolatos fogalmak, jelölések összefoglalása . .	2
2. A poszteriori hibabecslések és adaptív módszerek	7
2.1. Néhány korábbi eredmény	8
2.2. Saját eredmények	10
2.2.1. A Poisson-feladattal kapcsolatos hibabecslések élesítése	11
2.2.2. A poszteriori hibabecslések harmonikus Maxwell-egyenletekre I. .	13
2.2.3. A poszteriori hibabecslések harmonikus Maxwell-egyenletekre II. .	14
3. Nemfolytonos Galjorkin-módszerek	17
3.1. Egy konkrét módszer és az ezzel kapcsolatos korábbi eredmények	17
3.2. Saját eredmények	19
4. Galjorkin-módszerek törtrendű Poisson-feladatokra	23
4.1. Néhány korábbi eredmény	24
4.2. Saját eredmények	25
4.2.1. Véges differencia-módszerek, korrekt kitűzésű feladatok	25
4.2.2. Galjorkin-módszer, mátrixtranszformáció	25

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Általános rész

A dolgozat témája és szerkesztésének elve A dolgozatban azokat az eredményeket ismertetem, amelyeket peremérték-feladatok numerikus megoldására vonatkozó Galjorkin-módszerekkel kapcsolatban - általában társszerzőkkel együtt - értem el. Ehhez kapcsolódóan három különböző részterületet érintek. Az ismertetett állítások bizonyítását minden esetben mellőzzük, azonban igyekszünk ezek jelentésére és gyakorlati hasznára rámutatni. A munkában bizonyos egyensúlyra törekszünk: a szereplő fogalmakat meglehetősen speciális szituációkban írjuk le, hogy viszonylag kevés jelöléssel lehessen dolgozni, ugyanakkor elég általános legyen a tárgyalás ahhoz, hogy a felmerülő matematikai problémák lényege érthető legyen.

A kutatási terület kapcsolata mérnöki és természettudományi problémákkal Habár a jelen összefoglalás tisztán matematikai eredményeket mutat be, a Galjorkin-módszerek (vagy végeselem-módszerek) jórészt gyakorlati jelentőségük miatt váltak népszerűvé és matematikai vizsgálat tárgyává. Sőt, az alkalmazás előbbre jár, mint a matematikai analízis. Olyan eljárásokat alkalmaznak, amelyek pontos konvergenciasebességét vagy megfelelő normában vett konvergenciáját nem ismerjük. Elsősorban pontos számolást igénylő összetett gyakorlati feladatok megoldására használnak ilyen módszereket. Fontosabb példaként említhetők a következők: áramlástan szimulációk, ezzel összefüggő tervezési feladatok, statikai problémák, földtani szerkezetvizsgálatok, elektromágneses hullámok terjedésének szimulációja. Sőt, több feladat esetén a pontosság sem elegendő, a közelítő megoldást ugyanis a rendelkezésre álló viszonylag rövid idő alatt kell kiszámítani. Fontos példák erre az időjárás-előrejelzés (beleértve hurrikánok, tornádók fejlődésének szimulációját), a cunami-előrejelzés és bizonyos eseti szennyezések terjedésének előrejelzése.

Jórészt ezek a gyakorlati problémák adják a dolgozatban ismertetett összes kutatási

iránnyal kapcsolatos motivációt.

A dolgozat szerkezete A matematikai bevezetés után három részre tagolódik a munka. Először a végeselem-közelítések hibájának pontosabb, illetve részletesebb becslésével foglalkozom, amely a megfelelő feladatok adaptív numerikus megoldásának egyik fő komponense. Az eredményeket tartalmazó második fejezetben a Galjorkin-módszerek egy modern fejezetét elemzem: fő eredményként elliptikus peremérték-feladatok esetére olyan normában adok becslést, amelynek gyakorlati jelentése van. Az utolsó fejezet témája a törtrendű Laplace-operátort tartalmazó Poisson-feladat végeselem-megoldásának vizsgálata.

A függelékben azokat a jelöléseket sorolom fel, amelyek a dolgozatban több helyen is előfordulnak.

Numerikus kísérletek, tesztek Majdnem minden kapcsolódó publikáció fontos részét képezték a numerikus kísérletek, amelyeket hosszabb-rövidebb leírásban ismertettek. A Poisson-egyenletekkel kapcsolatos kutatásban ezt Horváth Tamás, a Maxwell-egyenletekkel kapcsolatos két részben Davit Harutyunyan végezte. A nemfolytonos Galjorkin-módszer Maxwell-egyenletekre történő alkalmazásában ez Sármány Domokos, az egydimenziós átlagolást használó fejezetében Csörgő Gábor munkája volt. A törtrendű feladatokkal kapcsolatos numerikus kísérletekhez Szekeres Béla írta a szükséges programokat.

1.2. Galjorkin-módszerekkel kapcsolatos fogalmak, jelölések összefoglalása

A megoldandó feladat A Galjorkin-típusú módszerek azon családját vizsgáljuk, amelyek az

$$Lu = f \tag{1.2.1}$$

alakban felírt peremérték-feladatok numerikus megoldására szolgálnak. A következő jelöléseket többször használjuk a dolgozatban:

- $L : [L_2(\Omega)]^n \rightarrow [L_2(\Omega)]^n$ egy lineáris differenciáloperátor
- $u, \mathbf{u}, \mathbf{E} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \mathbb{R}^n$ az ismeretlen függvények
- $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ egy Lipschitz-tartomány
- $f \in L_2(\Omega), \mathbf{f} \in [L_2(\Omega)]^n$ adott függvények.

Itt \mathbf{f} a peremfeltétel inhomogenitását is tartalmazza és az L operátor szabatos definíciója magában foglalja a peremfeltétel típusát. Minden esetben vastag betűvel jelöljük

azokat a függvényeket, ismeretleneket, amelyek értéke nem egydimenziós.

1. Példa *Poisson-feladat inhomogén Dirichlet-peremfeltétellel.*

Legyen $n = 1$, és adott $f_0 \in L_2(\Omega)$, $g \in C(\partial\Omega)$ esetén a megoldandó feladat

$$\begin{cases} -\Delta u(\mathbf{x}) = f_0(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (1.2.2)$$

ahol feltesszük, hogy létezik olyan $u_g \in C^2(\bar{\Omega})$ függvény, amelyre $u_g|_{\partial\Omega} = g$. Ekkor $L = -\Delta$, ahol $\mathcal{D}(\Delta) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, $f = f_0 + \Delta u_g$, továbbá $H = H_0^1(\Omega)$.

2. Példa *Harmonikus Maxwell-egyenlet homogén peremfeltétellel.*

Legyen $n = d = 3$, és adott $\mathbf{f} \in [L_2(\Omega)]^3$, illetve $k \in \mathbb{R}^+$ esetén a megoldandó feladat

$$\begin{cases} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) - k^2 \mathbf{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ \boldsymbol{\nu} \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) = 0 & \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (1.2.3)$$

Ekkor $L\mathbf{u} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} - k^2 \mathbf{u}$, ahol $\mathcal{D}(L) = H_0^2(\text{curl}, \Omega)$, továbbá $H = H_0(\text{curl}, \Omega)$.

Minden esetben feltesszük, hogy az (1.2.1) problémához tartozó peremérték-feladat korrekt kitűzésű, és a megoldás egy adott $H \subset [L_2(\Omega)]^n$ Hilbert-térben van. A fenti két példában a $H_0^1(\Omega)$ tér normáját $\|\cdot\|_1$, a $H_0(\text{curl}, \Omega)$ tér normáját $\|\cdot\|_{\text{curl}}$ jelöli. Ha az adott függvények a K résztartományon értelmezettek, akkor a $\|\cdot\|_{1,K}$, ill. a $\|\cdot\|_{\text{curl},K}$ jelöléseket használjuk.

A Galjorkin-módszerhez egy integrálátalakító formulát kell használnunk, amely eleendően sima függvényekre - legalább egy H -ban sűrű altér elemeire - az $(Lu, v) = a(u, v)$ egyenlőséget adja valamilyen $a : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ bilineáris forma esetén, ahol (\cdot, \cdot) jelöli az $[L_2(\Omega)]^n$ tér skalárszorzatát.

A feladat variációs (gyenge) alakja Ekkor a következő feladatot az (1.2.1) problémához tartozó variációs feladatnak nevezzük, a módszert pedig Galjorkin-módszernek: Keresünk olyan $u \in H$ függvényt, amelyre minden $v \in H$ esetén

$$(Lu, v) = a(u, v) = (f, v). \quad (1.2.4)$$

Ezen feladat megoldását az (1.2.1) feladat variációs vagy gyenge megoldásának nevezzük.

1. Példa (folytatás) Keresünk olyan $u_0 \in H_0^1(\Omega)$ függvényt, amelyre minden $v \in H_0^1(\Omega)$ esetén

$$(\nabla u_0, \nabla v) = (f, v).$$

Ekkor az $u_0 + u_g$ függvény az (1.2.2) feladat *gyenge megoldása*.

2. Példa (folytatás) Keresünk olyan $\mathbf{E} \in H_0(\text{curl}, \Omega)$ függvényt, amelyre minden $\mathbf{v} \in H_0(\text{curl}, \Omega)$ esetén

$$(\nabla \times \mathbf{E}, \nabla \times \mathbf{v}) - k^2(\mathbf{E}, \mathbf{v}) = (\mathbf{f}, \mathbf{v}).$$

Végelem-módszer Az (1.2.4) feladat „természetes” diszkretizációjához legyen $V_h \subset H$ egy véges dimenziós altér. Most olyan $u_h \in V_h$ függvényt keresünk, amelyre minden $v_h \in V_h$ esetén

$$a(u_h, v_h) = (f, v_h).$$

Ezt *konform Galjorkin-módszernek* vagy *végelem-módszernek* nevezzük. Itt a véges dimenziós V_h altér azonosítható \mathbb{R}^N -nel valamilyen N -re, vagyis az u_h -ra vonatkozó feladat egy

$$A\mathbf{u}_h = \mathbf{f} \tag{1.2.5}$$

lineáris egyenletrendszerre vezet. Az ebben szereplő $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mátrixot konkrétan is megadhatjuk: j -edik sorának k -edik eleme nem más, mint $a(b_k, b_j)$, ahol $\{b_j\}_{j=1,2,\dots,N}$ a fenti véges dimenziós tér egy bázisa. Hasonlóan a jobb oldalon az \mathbf{f} vektor j -edik eleme (f, b_j) .

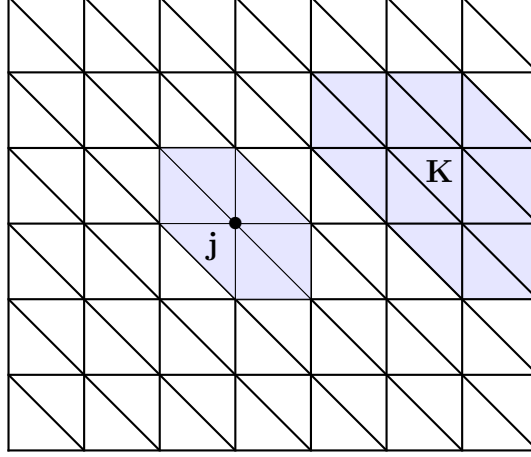
A végelem-tér Egy végelem-módszert tehát az definiál, hogy megadjuk a V_h véges dimenziós alteret, pontosabban ezeknek egy családját.

Ehhez rendszerint a tartomány egy felosztását definiálják (ha Ω egy politóp, akkor vehető például egy szimpliciális felosztás). Minden résztartományon valamilyen fokszámú polinomokat tekintünk úgy, hogy az ezekből kapott, az egész felosztáson definiált V_h tér elemei folytonosak legyenek. A K résztartományon értelmezett p -edfokú polinomok vektorterét $\mathbb{P}_{p+1}(K)$ jelöli. Többször használjuk a K résztartomány nyomára a $\hat{K} = \{\text{int} \cup_{j \neq 0} \bar{K}_j \in \mathcal{T}_h : \bar{K} \cap \bar{K}_j \neq \emptyset\}$ jelölést; ld. az 1.2.1 Ábrát.

3. Példa Osszuk fel a fenti téglá alakú Ω tartományt az 1.2.1 Ábrán látható módon egybevágó háromszögekre! Legyen továbbá a b_j függvény olyan, amely a j rácspontban 1, mindenhol máshol nulla, és minden háromszögön lineáris! Ekkor a belső rácspontok halmazát J -vel jelölve legyen $V_h = \text{span}(\{b_j\}_{j \in J})$, amely nyilván része a $H_0^1(\Omega)$ térnek. Az ábrán látható esetben a b_j bázisfüggvény pontosan a j körüli szürke résztartományon nem nulla.

Általában is érvényes, hogy az Ω tartomány tetszőleges \mathcal{T}_h szimpliciális felosztásán a

$$V_h = \{u_h \in C(\Omega) : u_h|_K \text{ lineáris minden } K \in \mathcal{T}_h \text{ esetén, } u_h|_{\partial\Omega} = 0\}$$



1.2.1. ábra. Egy téglalap alakú tartomány uniform háromszög-felosztása, a j csúcsához tartozó elsőrendű Lagrange-bázisfüggvény tartója, továbbá a K résztartomány nyoma.

függvényhalmaz az $H_0^1(\Omega)$ tér altere.

Ugrások és átlagok Több alkalommal használjuk a résztartományok közös határán definiált ugrás- és átlagfüggvényeket. Ehhez legyen K_j és K_k két szomszédos résztartomány a kifelé mutató $\boldsymbol{\nu}_j$ és $\boldsymbol{\nu}_k$ normálisokkal. Ekkor az $f_{j,k}$ közös határon vett ugrást a

$$[[v]]_{f_{j,k}} : \text{int } (\overline{\Omega_j} \cap \overline{\Omega_k}) \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad [[v]]_{f_{j,k}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\nu}_j v(\mathbf{x}_j) + \boldsymbol{\nu}_k v(\mathbf{x}_k)$$

egyenlőséggel definiáljuk, ahol a v függvény \mathbf{x} pontban vett Ω_j és Ω_k oldali határértékét $v(\mathbf{x}_j)$ és $v(\mathbf{x}_k)$ jelöli. Ez értelmezhető akkor is, ha $\mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ típusú; ez esetben a normálisokkal való skalárszorzatot kell tekintenünk. Tehát vektor értékű függvény esetén az ugrás skalár, skalár értékű függvény esetén pedig \mathbb{R}^d -beli vektor.

Sajnos, ez nem a legszerencsésebb jelölés, mert a Heaviside-függvény ugrása esszerint -1. Magától értetődő az átlagfüggvény definíciója:

$$\{v\}_{f_{j,k}} : \text{int } (\overline{\Omega_j} \cap \overline{\Omega_k}) \rightarrow \mathbb{R}^d, \quad \{v\}_{f_{j,k}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(v(\mathbf{x}_j) + v(\mathbf{x}_k)).$$

A résztartományok határainak halmazát \mathcal{F} -fel jelöljük. Használjuk még a $K_0 = \Omega^c$ jelölést is, míg pozitív egészekkel a \mathcal{T}_h elemeit indexeljük. Az első jelölés azért hasznos, mert az ugrásokat és átlagokat adott peremfeltételek esetén a határon is értelmezhetjük.

A számítási hiba Ha az (1.2.1) feladat megoldását az (1.2.5) rendszer megoldásával közelítjük, akkor alapvetően kétféle forrásból származhat a számítási hiba. Egyrészt abból, hogy a megoldást nem H -ban, hanem V_h -ban keressük, másrészt abból, hogy a (rendszerint nagy) lineáris rendszer megoldása nem pontos, sőt a rendszer felírásakor is közelítést használunk, mert az (f, b_j) integrálokat rendszerint kvadratúrákkal számítjuk ki. Mi csak az első típusú hibával foglalkozunk.

A számítási hiba csökkentése A számítási hiba csökkentéséhez a fenti V_h alterek valamilyen családját használjuk.

4. Példa Tekintsük az Ω tartomány olyan szimpliciális felosztásait, amelyre az alábbiak teljesülnek:

- Ha P csúcsa egy K_j szimplexnek, akkor P csúcsa a K_k szimplexnek is, ha annak határán van.
- Van olyan C konstans, hogy tetszőleges felosztásban szereplő tetszőleges K szimplexre $C\rho(K) \geq \text{diam } K$, ahol $\rho(K)$ a K -ba írható gömb sugara.

A finomítási eljárásban egy adott közelítést kiszámítva rendszerint az alábbi lehetőségek közül választunk:

- Egy vagy több résztartományt finomítunk.
- Egy vagy több résztartományon a polinomiális bázist növeljük.
- Az előző két lépés mindegyikét megtesszük.

Hogyan, mi alapján hajtsuk ezt végre? Meddig kell ezt tennünk? Nem lehet, hogy valahol esetleg épp durvább felosztásra volna szükség? Hogyan biztosítsuk, hogy a kapott V_h alterek mindig az eredeti H Hilbert-térben legyenek?

A fenti, a hiba minimalizálására irányuló *adaptív* megoldási módszer a gyakorlat szempontjából különösen fontos, igazából ezen komplex eljáráshoz kapcsolódik az első két fejezet témája.

Kevésbé nyilvánvaló a *nem konform vagy nemfolytonos* Galjorkin-módszerek haszná, hiszen itt általában $V_h \not\subset H$. Ez a gyakorlatban azt jelenti, hogy a V_h tér elemei nem lesznek folytonosak. Az eljárást bővebben a 3. fejezetben ismertetjük.

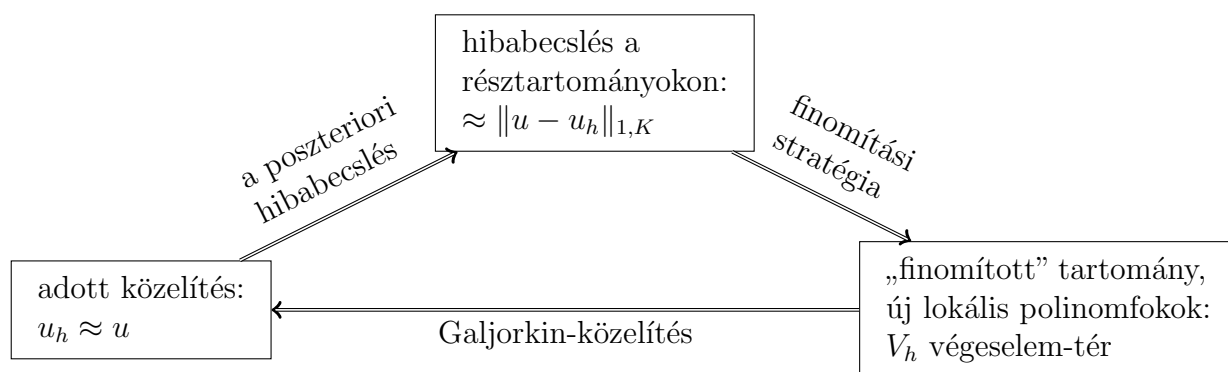
2. fejezet

A poszteriori hibabecslések és adaptív módszerek

Ebben a részben konform módszerekkel foglalkozunk, és feltesszük, hogy a felosztáscsaládban szereplő résztartományok egymás affin lineáris képei.

Bármilyen numerikus módszerrel kapcsolatban a legfontosabb kérdés az, hogy az ebből kapott közelítés hibája mekkora. Ezt általában csak becsülni tudjuk; pontosabban, előzetesen, a használt módszer konvergenciasebességét szokták megadni, illetve kiszámítani. Azonban ha egy adott feladat megoldásának valamilyen közelítését kiszámoljuk, akkor joggal várhatjuk, hogy ez a plusz információ pontosabb becslés elérését teszi lehetővé. Az adott közelítés függvényében előállított hibabecsléseket nevezzük *a poszteriori hibabecsléseknek*. Fontos kíváncsi, hogy a becslés ne csupán az egész tartományon vett hibára vonatkozzon, hanem az egyes résztartományokon is tudjuk becsülni a hibát, hiszen ez a legfontosabb mennyiség, amelyet egy-egy konkrét adaptív módszer során használunk.

Az a poszteriori hibabecslések ezen szerepét szemlélteti a következő ábra.



2.0.1. ábra. Galjorkin-módszerekhez kapcsolódó adaptív eljárások sematikus vázlata.

2.1. Néhány korábbi eredmény

Egy explicit hibabecslés Az első, széles körben idézett és használt becslést a [5] munkában publikálták. Eszerint, ha (az 1.2.2) feladat megoldására végeselem-módszert alkalmazunk, akkor tetszőleges \mathcal{T}_h felosztásban szereplő minden $K \subset \Omega$ résztartományra az

$$\eta_K = \sqrt{[\text{diam } K]^2 \|f - \Delta u_h\|_{0,K}^2 + [\text{diam } K] \|\llbracket \nabla u_h \rrbracket\|_{0,\partial K}^2}$$

mennyiség jó közelítése a lokális hibának abban az értelemben, hogy globális felső becslése és lokális alsó becslése:

$$\|u - u_h\|_1^2 \lesssim \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta_K^2, \quad (2.1.1)$$

$$\eta_K^2 \lesssim \|u - u_h\|_{1,K}^2 + h_K^2 \|f - \Pi_{0,h} f\|^2, \quad (2.1.2)$$

ahol az $s_1 \lesssim s_2$ reláció azt jelenti, hogy egy felosztástól független C konstansra $s_1 \lesssim C s_2$. η_K gyorsan kiszámítható, ezért egyes adaptív megoldóalgoritmusokban ma is használják. Azt reméljük azonban, hogy pontosabb becslés kapható akkor, ha például a vizsgált résztartomány alakját is figyelembe vesszük, nem csak egy azon kiszámolt mennyiséget.

Implicit hibabecslés A hiba részletesebb vizsgálatához az (1.2.1) egyenlet u_h közelítő megoldásának hibájára írunk fel egyenlőséget:

$$-\Delta(u - u_h) = f + \Delta u_h. \quad (2.1.3)$$

Ez minden résztartományon igaz, csak hogy

- nem ismerjük az $u - u_h$ hibára vonatkozó peremfeltételt,
- nem tudjuk, hogy a hiba becsléséhez a lokális egyenletet milyen végeselem-térben oldjuk meg.

A fenti problémákra adott egy-egy konkrét válasz esetén a hiba becslését résztartományonként egy-egy peremérték-feladat végeselem-megoldásából kapjuk. Mivel a hiba itt nem adott explicit módon, a módszert *implicit hibabecslés*nek nevezik az irodalomban. Érdemes megjegyezni, hogy a lokális problémákat jórészt Neumann-problémáknak szokták választani.

Több erre vonatkozó eredmény ismert; elsősorban az (1.2.1) egyenlet esetével foglalkoztak. Válasszuk először a Neumann-peremfeltételt a klasszikus átlagolási technikával, azaz

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \nabla(u - u_h) := \boldsymbol{\nu} \cdot \llbracket \nabla(u - u_h) \rrbracket = -\boldsymbol{\nu} \cdot \llbracket \nabla u_h \rrbracket,$$

ahol az utolsó egyenlőség csak $u \in C^1(\bar{\Omega})$ -beli megoldásokra érvényes. Ekkor a hiba becslésére vonatkozó lokális probléma a K résztartományon a következő:

$$\begin{cases} -\Delta(u - u_h)(\mathbf{x}) = f + \Delta u_h(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in K \\ \boldsymbol{\nu} \cdot \nabla(u - u_h)(\mathbf{x}) = -\boldsymbol{\nu} \cdot \{\!\!\{ \nabla u_h \}\!\!\}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial K. \end{cases} \quad (2.1.4)$$

Válasszuk a $W_h(K)$ véges dimenziós teret úgy, hogy abban a (2.1.4) feladatnak létezzen egyértelmű megoldása, és az összes többi $K \in \mathcal{T}_h$ résztartományon is ennek affin képét vegyük. Ekkor teljesül a következő.

2.1.1 Tétel. *A (2.1.4) feladat η_K^{FA} -vel jelölt végeelem-megoldása a valódi hiba lokális alsó becslése a következő értelemben:*

$$\eta_K^{\text{FA}} \lesssim \|u - u_h\|_{1,K}$$

továbbá η_K^{FA} a valódi hiba globális felső becslése a következő értelemben:

$$\|u - u_h\|_1 \lesssim \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \|\eta_K^{\text{FA}}\|^2.$$

A fenti eredmények élesíthetők abban az esetben, ha a Neumann-peremfeltételt egy összetettebb átlagolási eljárással választjuk, amelyet a $G_K : \hat{K} \rightarrow \bar{K}$ függvény definiál. Erről a gradiens-átlagról a következőket tesszük fel.

(A1) Minden $u \in \mathbb{P}(\hat{K})$ polinom esetén fennáll, hogy

$$G_K(\Pi_h u)(\mathbf{x}) = \Pi_h \nabla u(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in K.$$

(A2) Minden $G_K(u)$ csakis $u|_{\hat{K}}$ -től függ.

(A3) $G_K : W_\infty^1(\hat{K}) \rightarrow L_\infty(K)$ folytonos K -től függetlenül egyenletesen.

Ennek megfelelően a vizsgált lokális probléma a

$$\begin{cases} -\Delta(u - u_h)(\mathbf{x}) = f + \Delta u_h(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in K \\ \boldsymbol{\nu} \cdot \nabla(u - u_h)(\mathbf{x}) = -\boldsymbol{\nu} \cdot G_K(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial K. \end{cases} \quad (2.1.5)$$

5. Példa A Neumann-peremfeltételt egy háromszög-felosztáson úgy definiáljuk, hogy a gradiens értéke egy csúcson a csúcsot tartalmazó háromszögek középpontjaiban vett gradiensek átlaga. Ezután a csúcsok közt a gradienst lineáris interpolációval adjuk meg.

Egy extra feltétel, amely szuperkonvergenciát jelent, a következő:

(SC) Van olyan pozitív τ , hogy minden h diszkretizációs paraméterre

$$\|\nabla(u_h - \Pi_h u)\|_0 \leq C(u) h^{p_{\min} + \tau}, \quad (2.1.6)$$

ahol $p_{\min} = \min_{K \in \mathcal{T}_h} p_K$.

Ezen feltétel teljesülése nem csupán a pontos megoldás regularitásától, hanem a közelítésben használt végelelem-tér tulajdonságaitól is függ.

Ezeket a feltevéseket használva igazolták (lásd [29], [30], [1], 4. fejezet) a hibabecslés pontosságára vonatkozó következő állítást.

2.1.2 Tétel. *Tegyük fel, hogy a G_K operátorra teljesülnek az (A1)-(A3) feltevések, valamint a pontos megoldásra vonatkozólag az (SC) feltétel. Ekkor fennáll, hogy*

$$\|\nabla u - G(u)\|_0 \lesssim h^{p+\tau}$$

továbbá

$$\lim_{\max\{\text{diam } K, K \in \mathcal{T}_h \rightarrow 0\}} \frac{\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \eta_K^2}{\|u - u_h\|_1^2} = 1.$$

A második becslést röviden úgy mondják, hogy a hibabecslés *aszimptotikusan egzakt*. Azonban ez csak azt állítja, hogy a hibabecslések négyzetösszege pontos becslése az összes hiba négyzetének.

2.2. Saját eredmények

Az előző részben kapott eredmények élesítését a következő észrevételek alapján élesítjük:

- A fenti átlagolási eljárás során a peremfeltételekben kis fokszámú polinomok jelennek meg. Ha például minden résztartományon p -edfokú polinommal közelítünk, akkor a gradiens, és annak átlaga $p-1$ -edfokú, emiatt az ezekkel felírt lokális Neumann-problémák megoldása ismét p -edfokú. Ugyanakkor az a számítási tapasztalat, hogy ha a közelítést egyszer már kiszámoltuk a p -edfokú polinomok terében, akkor a kapott hibát egy magasabb fokú polinomiális térben érdemes keresni.
- Az ismert átlagolási eljárások a szomszédos résztartományokon vett értékeket egyenlő súllyal veszik figyelembe, holott a felosztásban lehetséges, hogy a kettő közül az egyik tartomány sokkal nagyobb.

Másrészt érdekes megvizsgálni, hogy további feladatok esetén is hasonló módon lehet-e a poszteriori hibabecsléseket konstruálni. Konkrétan a harmonikus Maxwell-egyenletek téma körével foglalkozunk, amelynek adaptív numerikus megoldása gyakorlati szempontból is fontos.

2.2.1. A Poisson-feladattal kapcsolatos hibabecslések élesítése

Ezeket az eredményeket élesítettük a [15] munkában, ahol a

$$\begin{cases} -\Delta u(\mathbf{x}) + k^2 u(\mathbf{x}) = f_0(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = 0 & \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{cases} \quad (2.2.7)$$

feladat végeelem-megoldásával foglalkoztunk, és a megfelelő implicit hibabecslésben szereplő lokális problémákhoz tartozó Neumann-peremfeltételeket definiáltuk. Azért változtattuk meg kissé a differenciáloperátort, hogy ne kelljen a lokális problémához tartozó végeelem-térből a konstans függvényt kizárni.

A fentiekén kívül a következő feltevessel éltünk:

(A4) $G_K(u_h)$ maga is gradiens, vagyis van olyan $\mathcal{G}_p(u_h) \in W_\infty^1(\Omega)$ függvény, hogy $G_K(u_h) = \nabla \mathcal{G}_p(u_h)|_T$.

6. Példa: Tekintsük egy $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ tartomány háromszögekre való felbontását, majd az u_h lokálisan elsőfokú végeelem-közelítést egy K háromszög három csúcsában, és három lapszomszédjának további három csúcsában! Illesszünk erre a hat adatra egy másodfokú p polinomot! Legyen a Neumann-peremfeltétel $\boldsymbol{\nu}_K \cdot \nabla p$ a K résztartomány határán!

7. Példa: Tekintsük egy $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ tartomány háromszögekre való felbontását, majd az u_h lokálisan másodfokú végeelem-közelítést egy K háromszög három csúcsában, lapjainak felezőpontjaiban, és három lapszomszédjának további három csúcsában és hat oldalflező pontjában! Illesszünk erre a 15 adatra egy harmadfokú p polinomot! Legyen a Neumann-peremfeltétel $\boldsymbol{\nu}_K \cdot \nabla p$ a K résztartomány határán!

Az így kapott gradiens-átlagból nyert implicit hibabecslés pontosságáról szól a munka fő eredménye:

2.2.3 Tétel. *Tegyük fel, hogy az (A1), (A2), (A3), (A4) és (SC) feltételek mindegyike teljesül. Ekkor a (2.1.5) implicit hibabecslés pontosságára érvényes a következő becslés:*

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \|e_h - \hat{e}_h\|_{1,K}^2 \lesssim h^{2(p+\tau)} |u|_{p+2}^2. \quad (2.2.8)$$

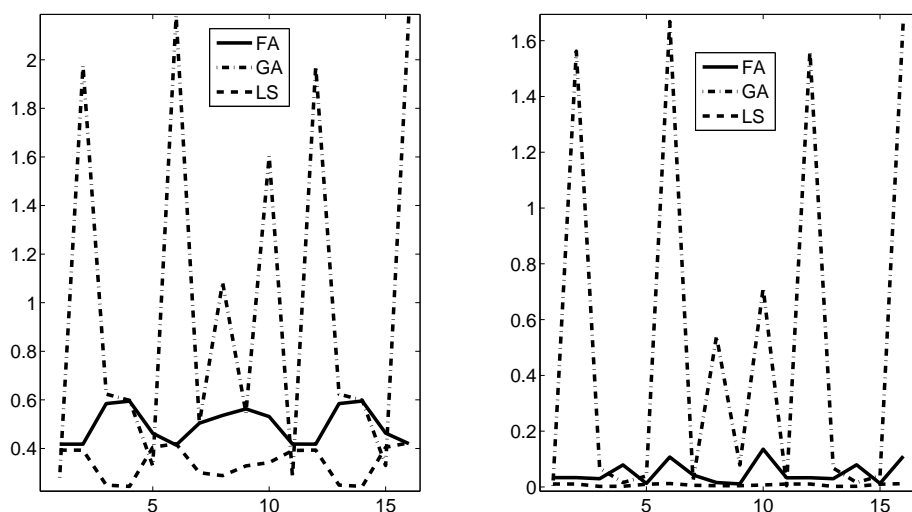
Figyeljük meg, hogy a fenti becslés finomabb, mint a [29] [30] munkában szereplő, mert nem csak azt állítjuk, hogy a résztartományokon vett hibabecslések összege jó becslése a résztartományokon vett összes hibának, hanem azt is, hogy a becslés résztartományonként is pontos. Továbbá, ha $\tau = 0$, akkor az (SC) feltevés automatikusan teljesül, és a 2.2.3 Tétel állításából ekkor is konvergencia következik.

Numerikus kísérletek Néhány konkrét példán is megvizsgáltuk, hogy az itt ismertett módszer hatékonyabb-e az előző szakaszban tárgyalt egyszerű átlagolási módszernél (FA), illetve a korábban leírt összetettebb átlagolási módszernél (GA).

Ehhez a (2.2.7) feladatban úgy definiáljuk az f_0 jobb oldalt, hogy a pontos megoldás az egységnégyzeten $u(x, y) = \sin 2\pi x \sin 2\pi y$ legyen. Az egységnégyzetet egybevágó háromszögekre osztottuk, azokon lokálisan másodrendű Lagrange-elemekkel oldottuk meg a feladatot. Néhány résztartományon összehasonlítottuk a valódi hibát azzal, amit a hibabecslés adott. A következő jelöléseket használtuk:

$$d(L_{2,K}) := (\|\partial_\nu e_h - \partial_\nu \hat{e}_h\|_{L_2(\partial K)}^2)^{\frac{1}{2}} \quad \text{és} \quad d(H_K^1) := (\|e_h - \hat{e}_h\|_{H^1(K)}^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.2.9)$$

A különböző módszerekkel kapott kibabecslések összehasonlításának eredménye látható a 2.2.1 ábrán.



2.2.2. ábra. Implicit hibabecslések pontosságának összehasonlítása a peremfelétel háromféle - FA, GA és LS (saját) - választása esetén. Vízszintes tengelyek: egyes kijelölt tartományok sorszáma. Függőleges tengely - bal oldal: a hibára vonatkozó pontos peremfelétel és a becsült peremfeltétel eltérése, azaz $d(L_{2,K})$. Függőleges tengely - jobb oldal: a hiba pontos és becsült értékének eltérése, azaz $d(H_K^1)$.

Megjegyzések: 1. A 6. példában szereplő illesztési eljárásnál egyszerűbben is kiszámítható az ott szereplő gradiens, ha a háromszög-felosztás egyenletes [15].
2. Az (A4) feltevésben szereplő folytonosság két természetes követelmény következményeként automatikusan adódik [15]. Az ezekkel való számolást az teszi kissé bonyolulttá, hogy a \hat{K} alakú nyomok közt általában nem létesíthető affin lineáris bijekció.

3. Mivel a hibabecsléseket hatékony számításokban kell felhasználnunk, lényeges, hogy a módszer ne csak kellően pontos, hanem gyors is legyen. Gyakorlatilag a módszer résztartományonként egy-egy lineáris rendszer megoldását igényli. Általában a résztartományok és az egyes referencia-tartományok közötti transzformációk adottak, gyakran egyetlen mátrix inverzét elegendő kiszámítani, egyébként csak mátrixszorzásokat kell végezni. Sőt, a merevségi mátrix összeállítása sem összetett, hiszen a bázisfüggvények lokálisak.

2.2.2. A poszteriori hibabecslések harmonikus Maxwell-egyenletekre I.

Adott $\mathbf{f} \in [L_2(\Omega)]^3$ esetén az

$$\begin{cases} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) - k^2 \mathbf{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ \boldsymbol{\nu} \times \mathbf{E}(\mathbf{x}) = 0 & \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{cases}$$

feladat \mathbf{E}_h végeselem-megoldásának $\mathbf{e}_h := \mathbf{E} - \mathbf{E}_h$ hibáját keressük.

A feladat a poszteriori hibaanalízisének alapja a következő állítás: Minden $\mathbf{v} \in H_0(\text{curl}, K)$ esetén

$$(\nabla \times \mathbf{e}_h, \nabla \times \mathbf{v}) - k^2(\mathbf{e}_h, \mathbf{v}) = (\mathbf{r}_K, \mathbf{v}) + (\mathbf{R}, \mathbf{v})_{\partial K},$$

ahol $\mathbf{r}_K = \mathbf{f} - \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_h + k^2 \mathbf{u}_h|_K$ és $\mathbf{R}_K = \boldsymbol{\nu}_K \times \llbracket \nabla \times \mathbf{E}_h \rrbracket$. Itt használtuk a $\nabla \times$ operátorra vonatkozó Green-formulát.

Ugyancsak ennek segítségével nyerjük, hogy tetszőleges $K \in \mathcal{T}_h$ esetén az $\mathbf{E} - \mathbf{E}_h$ hibára fennáll következő egyenlőség:

Minden $\mathbf{v} \in H_0(\text{curl}, K)$ esetén

$$\begin{aligned} & (\nabla \times \mathbf{e}_h, \nabla \times \mathbf{v})_K - k^2(\mathbf{e}_h, \mathbf{v})_K = \\ & = (\mathbf{f}, \mathbf{v}) - (\boldsymbol{\nu}_K \times \nabla \times \mathbf{E}, \mathbf{v})_{\partial K} - (\nabla \times \mathbf{E}_h, \nabla \times \mathbf{v})_K + k^2(\mathbf{E}_h, \mathbf{v})_K. \end{aligned} \tag{2.2.10}$$

Itt a jobb oldalon a $\boldsymbol{\nu}_K \times \nabla \times \mathbf{E}$ mennyiség ismeretlen, amit a szomszédos lapokon vett értékek átlagával közelítettünk, majd a kapott problémát végeselem-módszerrel egy lokális V_K végeselem-térben oldottuk meg. Az így kapott implicit hibabecslésről igazoltuk, hogy hibára vonatkozó lokális alsó korlátként használható:

2.2.4 Tétel. *Tetszőleges V_K esetén a (2.2.10) feladat $\hat{\mathbf{e}}_K$ végeselem-megoldására teljesül, hogy valamilyen, a felosztásparámétertől független C konstansra*

$$\|\hat{\mathbf{e}}\|_{\text{curl}, K}^2 \lesssim (1 + k^2) \|\mathbf{e}_h\|_{\text{curl}, \hat{K}}^2 + (\text{diam } K)^2 \|\mathbf{r}_K - \Pi_h \mathbf{r}_K\|_K^2 + \text{diam } K \|\mathbf{R}_K - \Pi_h \mathbf{R}_K\|_{\partial K}^2.$$

Numerikus kísérletek Az implicit hibabecslés konkrét megvalósításához meg kell adnunk a végeselem-teret, amelyben az eredeti \mathbf{E}_h közelítést, illetve a hibára vonatkozó lokális problémát megoldjuk. A [16] munkában az eredeti V_h tér a Nédélec-elemek kocka-felbontásra értelmezett első családja volt, amely egy-egy kockán 12 dimenziós (ugyanis az éleknek feleltet meg bázisfüggvényeket). A lokális megoldáshoz használt végeselem-tér kilenc báziselemét pedig a következő hozzárendeléssel adtuk meg - az (x, y, z) térváltozókat, valamint a $h(w) = w(1 - w)$ hozzárendeléssel definiált függvényt használva):

$$\begin{array}{lll} ((1-x)h(y)h(z), 0, 0) & (xh(y)h(z), 0, 0) & (h(x)h(y)h(z), 0, 0) \\ (0, (1-y)h(x)h(z), 0) & (0, yh(x)h(z), 0) & (0, h(x)h(y)h(z), 0) \\ ((1-z)h(x)h(y), 0, 0) & (zh(x)h(y), 0, 0) & (h(x)h(y)h(z), 0, 0) \end{array}$$

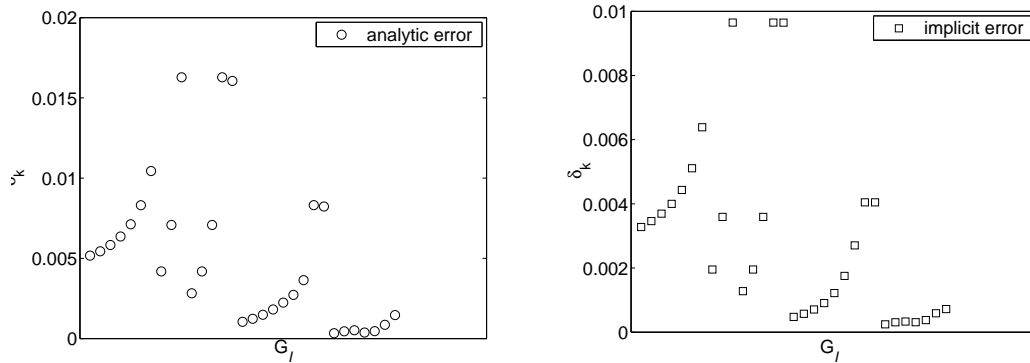
- Első tesztfeladat: Ebben az esetben $\Omega = (-1, 1)^3$, továbbá a pontos megoldás $\mathbf{E} = \nabla f$, ahol $f(x, y, z) = \max\{|x|, |y|, |z|\}$. Belátható, hogy $\mathbf{E} \in H^{\frac{1}{2}-\epsilon}(\Omega)$ pontosan akkor teljesül, ha $\epsilon > 0$. Ennek megfelelően nagyjából 1/2-edrendű konvergenciát tapasztaltunk a $\|\cdot\|_{\text{curl}}$ -normában, továbbá a lokális hibák becslése éppen ott adott nagy értéket, ahol valóban nagyok voltak a lokális hibák.
- Második tesztfeladat: A kísérletet ebben az esetben az $\Omega = (-1, 1)^3 \setminus [0, 1]^3$ tartományon (Fichera-kocka) végeztük olyan esetben, amikor a peremfeltételeket úgy választottuk, hogy a pontos megoldás polárkoordinátákkal $\mathbf{E}(x, y, z) = \nabla(r^{\frac{2}{3}} \sin(\frac{2}{3}\phi))$ legyen. Itt is nagyon jól kimutatta az implicit hibabecslés azokat a helyeket, ahol a relatív hiba nagy volt. $h = \frac{1}{16}$ finomságú felosztásnál a valódi hiba minden esetben mintegy 1,7-szerese volt a becsültnek. Ezt az eredményt szemlélteti a 2.2.3 ábra.

Az ezekhez tartozó numerikus szimulációkat egy hibrid program segítségével hajtottuk végre, amelyben a lineáris rendszerben szereplő mátrixot egy C++ nyelven írt eljárás segítségével állítottuk össze, míg a rendszer megoldását egy Matlab-szubrutin végezte.

Mindkét esetben jól használható tehát a hibabecslés adaptív eljáráshoz, mert éppen azokban a résztartományokban jelez relatíve nagy számítási hibát, ahol az a többi résztartományon levő hibához képest nagy.

2.2.3. A posztteriori hibabecslések harmonikus Maxwell-egyenletekre II.

A [14] munkában az analízist kissé kellett megváltoztatni, hogy az a tetraéder-felosztás esetére is alkalmazható legyen. A dolgozat legfontosabb elméleti eredményében kimutattuk, hogy a hibabecslésben szereplő lokális problémákhoz tartozó lineáris feladatok egyenletesen jól kondicionáltak. Itt az eredeti közelítéshez mindig elsőrendű klasszikus Nédélec-elemeket, a hibabecsléshez egy komponensenként harmadfokú polinomiális



2.2.3. ábra. Számítási hibák nagysága ($e_K = \|\mathbf{e}\|_{K,\text{curl}}$) az egyes résztartományokban (bal oldal) és a számítási hibák becslése (δ_K) a leírt implicit módszerrel (jobb oldal) a Fichera-kocka egy $h = \frac{1}{16}$ oldalhosszú egyenletes kocka-felosztásán. Vízszintes tengely: a tesztfeladat során kiválasztott résztartományok sorszáma.

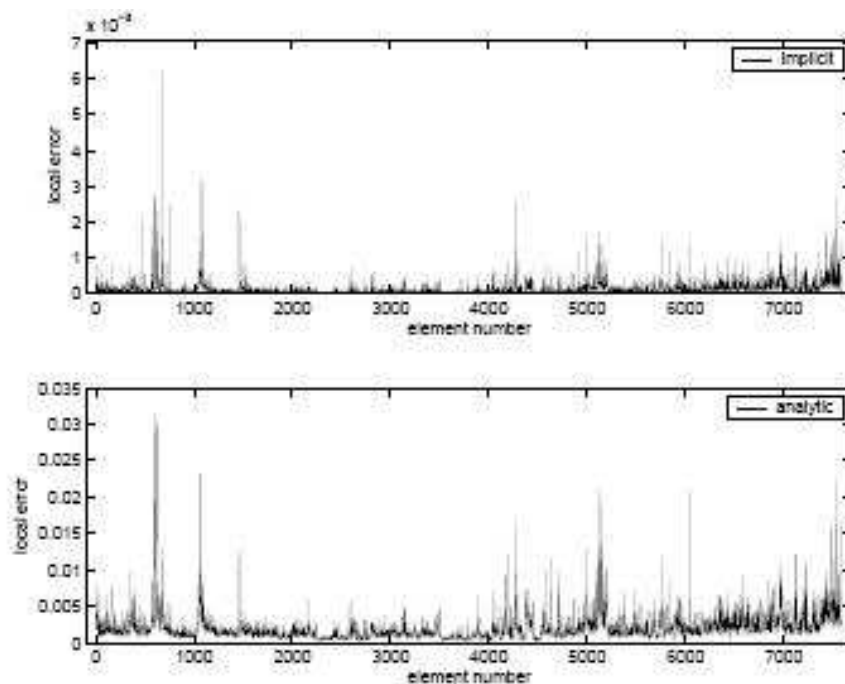
bázist használtunk. Az implicit hibabecslés alapján adatív megoldási eljárást is javasoltunk, illetve futtattunk. Az eljárás lényege az volt, hogy a tetraéderek azon tíz százalékát jelöltük meg finomításra, ahol a hibabecslés a legnagyobb értéket adta.

Numerikus kísérletek Először itt is tesztfeladaton vizsgáltuk a hibaindikátor pontosságát. Ehhez a résztartományonkénti pontos hiba és becsült hiba korrelációját számoltuk ki, amely nagyon közel volt 1-hez. A kísérleti analízisben ezt a módszert még nem láttuk, pedig talán a legjobb mérőszám annak eldöntésére, hogy egy hibaindikátor használható-e adaptív finomításhoz. Az összes résztartományon a tényleges és a becsült hibát mutatja a 2.2.3 ábra. Az adaptív eljárás implementációja meglehetősen összetett volt. Egy külső szoftver osztotta a tartományt tetraéderekre, és végezte a finomítást az általunk megjelölt tetraéderek körül. Ugyanis nem lehetséges csak egyes tetraédereket finomítani (ld. a következő fejezetet). Közben arra is ügyelni kell, hogy a felosztáscsaládban ne alakuljanak ki olyan tetraéderek, amelyek átmérője túl nagy a beírható gömb sugarához képest.

A hatékony hibabecslésnek köszönhetően ez az összetett algoritmus is kb. tízszer gyorsabbnak bizonyult, mint a tartomány egyenletes finomításával kapott hibacsökkentő módszer, azaz adott (kis) hiba eléréséhez mintegy 10-szer kevesebbet kellett számolni.

További feladatok, kérdések

A terület legfontosabb kérdése az, hogyan lehet egységes analízist adni a *hp*-módzerekre, amelyeket a 2.0.1 ábrán szemléltettünk. Azaz hogyan lehet a konkrét hibabecslést is felhasználva az adaptív eljárást lépésenként úgy végrehajtani, hogy a számítási hiba exponenciálisan csökkenjen a számítási idő függvényében. Erre csak az utóbbi néhány



2.2.4. ábra. Implicit hibabecslés eredményének (fent) és a tényleges hibának (lent) összehasonlítása elemenként a $\|\cdot\|_{\text{curl},K}$ -normában. Vízszintes tengely: az egyes K résztartományok sorszáma.

évben sikerült választ kapni néhány egyszerű esetben, a megfelelő elmélet azonban nagyon bonyolult [24]. Ugyanakkor ilyen módszereket keresünk a gyakorlatban, ezért kísérletileg részletesen vizsgálták ezeket [21].

3. fejezet

Nemfolytonos Galjorkin-módszerek

A nemfolytonos Galjorkin-módszerek matematikai vizsgálata a numerikus analízis egy modern fejezete; a témakört részletes elméleti háttérrel tárgyaló első monográfia nemrég jelent meg [11].

Ilyen módszereket jellemzően az alkalmazásokban felmerülő, nehéz számítási feladatokban használnak komplex áramlási problémák, légköri, földtani szimulációk végrehajtásához. Azért választják a gyakorlatban ezt az eljárást, mert a számításban használt tartomány adaptív finomítása és a lokális polinomiális közelítés rendjének változtatása ezzel a módszerrel dolgozva gyakorlatilag korlátozás nélkül végrehajtható. Ugyanez a hagyományos végeelem-módszerekkel dolgozva rendkívül nehézkes.

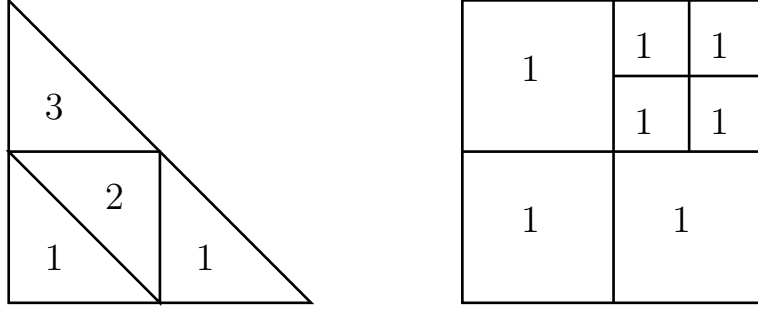
Két olyan esetet szemléltetünk, ahol a kívánt finomítás (egy p , illetve egy h típusú) a folytonos Galjorkin-módszer keretében nem hajtható végre.

A módszer matematikai szempontból azért jelent kihívást, mert a hagyományos (folytonos vagy helyesebben konform) Galjorkin-módszerektől eltérően a közelítő megoldást olyan alterekben keressük, amelyek nem részei annak a (jellemzően Szoboljev-) térnek, ahol a megoldásnak lennie kell. Mindez akkor jelentkezik, ha másodrendű differenciál-operátorokról van szó, ahol a megoldásról valamilyen regularitást tudunk, illetve feltételezünk.

Lehetséges az is, hogy az (1.2.1) feladat megoldása eleve nemfolytonos vagy a megoldás regularitási tulajdonságát nem ismerjük. Sőt, alkalmazásokban olyan rendszerek is előfordulnak, ahol az ismeretlen egyik komponense folytonos, a másik pedig esetleg nem. Egy ilyen példa numerikus megoldásának hibaanalízisét készítettük el a [27] munkában.

3.1. Egy konkrét módszer és az ezzel kapcsolatos korábbi eredmények

A módszert és a kapcsolódó főbb eredményeket a másodrendű lineáris elliptikus peremérték-feladatok példáján mutatom be.



3.0.1. ábra. Adaptív finomítási eljárások, amelyeket csak nemfolytonos függvényeket tartalmazó végelemek-terekben végezhetünk. A számok a lokális polinom-fokszámokat jelzik. Bal oldal: p -finomítás egy uniform háromszögrácson, jobb oldal: h -finomítás egy uniform négyzetrácson.

A végelemek-tér Legyen most a (2.2.7) feladat numerikus megoldásához

$$V_h = \mathbb{P}_{\mathbf{h}, \mathbf{k}} = \{u \in L_2(\Omega) : u|_{K_j} \in P_{k_j}(K_j) \forall K_j \in \mathcal{T}_{\mathbf{h}}\},$$

ahol $P_{k_j}(K_j)$ jelöli a K_j résztartományon legfeljebb k_j -edfokú polinomok vektorterét. Itt $\mathbf{k} = (k_1, k_2, \dots)$, valamint $\mathbf{h} = (h_1, h_2, \dots)$, ahol $h_j = \text{diam } K_j$, és legyen $h = \min_j h_j$. A V_h tér elemei nem feltétlenül folytonosak, vagyis $V_h \not\subset H_0^1(\Omega)$, azaz a megfelelő Galjorkin-módszer nem lesz konform. Ez lehetővé teszi azokat a finomítási eljárásokat, amelyeket a 3.0.1 ábrán vázoltunk.

A bilineáris forma A büntetőtagot tartalmazó (IP) Galjorkin-módszert a következő bilineáris formával definiáljuk:

$$a_{\text{IP}, s}(u, v) = (\nabla_h u, \nabla_h v) - (\{\nabla_h u\}, \llbracket v \rrbracket)_{\mathcal{F}} - (\{\nabla_h v\}, \llbracket u \rrbracket)_{\mathcal{F}} + \sigma_{f, s} \sum_{f \in \mathcal{F}} (\llbracket u \rrbracket, \llbracket v \rrbracket)_f. \quad (3.1.1)$$

A módszert az definiálja pontosan, ha megadjuk a $\sigma_{f, s}$ mennyiséget, ami a standard módszernél $\frac{C}{\text{diam } f}$ alakú, ahol gyakran a $C = 10$ választással élnek. A fentiekben $s \in \mathbb{R}^+$ egy alkalmas paraméter.

Hasonló módszerek egész családját definiálták és elemezték a [4] munkában, amelyet a témakörben alapcikknek tekintenek. Az itt szereplő analízisben feltették, hogy a pontos megoldásra $u \in H^2(\Omega)$ teljesül, ami furcsa, hiszen nemfolytonos függvényekkel való közelítéstől azt várnánk, hogy egy nem sima megoldást is pontosan közelít.

A büntetőtag A C paraméter megfelelő válsztásának célja $a_{\text{IP},s}$ ellipticitásának és így a kapott végesdimenziós feladat egyértelmű megoldhatóságának biztosítása. A [2] munkában elemezték, hogy C rögzített értéke esetén milyen résztartományok használhatók. Mindez elkerülhető, ha a $\sigma_{f,s} = \frac{C}{(\text{diam } f)^s}$ választással élünk, ahol $s \geq 3$; ld. [7]. Azonban a túlzottan nagy büntetőtag miatt a kapott lineáris rendszer rosszul kondicionált lesz. Ezért a gyakorlatban fontos kérdés optimális nagyságú C paramétert találni. Egy konkrét esetben Maxwell-egyenletekre ezt a kérdést is vizsgáltuk a [23] munkában.

KonvergenCIAELMÉLET A módszer kvázioptimális konvergenciáját a következő normában igazolták:

$$\|u\|_{\text{dG}} = \sqrt{a_{\text{IP},s}(u, u)}.$$

Ez a norma azonban egy matematikai műtermék, amelynek már csak azért sem lehet gyakorlati jelentése, mert a közelítésben használt paramétertől függ. Az L_2 -normában vett hibabecslés viszont a fentiek következménye. Két egymástól független munka [8], [10] eredményeként a hibát a teljes változás normában is tudjuk becsülni.

Annak ellenére, hogy a nemfolytonos Galjorkin-módszereket szinte minden típusú problémára általánosították, az elmélet kerete továbbra is az [11], amit itt vázoltunk.

3.2. Saját eredmények

Az általunk folytatott vizsgálat [9], [17] célja a módszer analízisének élesítése a következő kérdésekre adott válaszokkal.

- Hogyan kaphatunk egy (3.1.1) alakú bilineáris formát a lehető legkevesebb heurisztikus gondolattal?
- Hogyan válasszuk meg a C paramétert, illetve az utolsó tagot ahhoz, hogy az $a_{\text{IP},s} : V_h \times V_h \rightarrow \mathbb{R}$ bilineáris forma elliptikus legyen?
- Nem lehet-e a pontos megoldásra vonatkozó feltételt elhagyni?
- Nem lehetséges-e a hatékony számítást és a $H^1(\Omega)$ -beli hibabecslést ötvözni, azaz nemfolytonos közelítésekből valamilyen módon lehet-e $H^1(\Omega)$ -beli konvergenciát kapni?

Talán az utolsó kérdés a legfontosabb, ugyanis az alkalmazásokban a H^1 -félnorma vagy norma gyakran az energiának felel meg.

8. Példa Összenyomhatatlan folyadékok örvény- és forrásmentes áramlását a $\Delta u = 0$ Laplace-egyenlettel írhatjuk le, ahol u a sebesség potenciálja, így ∇u a sebesség, vagyis $\frac{\rho}{2}|u|_{H^1}^2$ a mozgási energia, ahol ρ a folyadék sűrűsége.

Az analízis alapötlete Az analízis alapötlete az utolsó kérdésből származik. Ugyanis egy nemfolytonos u_{dG} közelítésből úgy kaphatunk folytonosat, ha ehelyett a $\eta_h * u_{\text{dG}}$ -vel jelölt simított közelítést tekintjük, ahol az η_h függvényt a későbbiekben adjuk meg. Léteznek is erre vonatkozó eredmények az irodalomban, amelyek azonban csak az $\|u - \eta_h * u_{\text{dG}}\|_0$ norma vagy ennél is gyengébb norma becslésére vonatkoznak [19], [20].

A simított függvények véges dimenziós terére használjuk a $V_{\eta,h} = \{\eta_h * v : v \in V_h\}$ jelölést. Lényeges észrevétel, hogy $V_{\eta,h} \subset H_0^1(\Omega_h)$, ahol $\Omega_h = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d : d(\mathbf{x}, \Omega) < \epsilon\}$.

Próbáljuk meg a diszkretizált feladatban eleve az $\eta_h * u_{\text{dG}}$ függvényt keresni, azaz tekintsük a következő két feladatot!

- Keresünk olyan $u_{\text{dG}} \in V_h$ függvényt, amellyel minden $v_{\text{dG}} \in V_h$ esetén

$$a_\eta(u_{\text{dG}}, v_{\text{dG}}) := (\nabla(\eta_h * u_{\text{dG}}), \nabla(\eta_h * v_{\text{dG}})) = (f, \eta_h * v_{\text{dG}}).$$

- Keresünk olyan $\eta_h * u_{\text{dG}} \in V_{\eta,h}$ függvényt, amellyel minden $\eta_h * v_{\text{dG}} \in V_{\eta,h}$ esetén

$$(\nabla(\eta_h * u_{\text{dG}}), \nabla(\eta_h * v_{\text{dG}})) = (f, \eta_h * v_{\text{dG}}). \quad (3.2.2)$$

A két feladatból nyert megoldás ugyanaz, de jól mutatja az analízis fő gondolatát: míg az első nem konform módszer, és így u_{dG} kiszámítását egyszerű adaptív algoritmusokkal végezhetjük, addig a második konform közelítést jelent, vagyis az erre vonatkozó konvergencia vizsgálatához a klasszikus végelem-analízis teljes eszköztára bevethető.

A következőkben az

$$\eta_h(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{B_{h^s,d}} & |\mathbf{x}| \leq h^s \\ 0 & |\mathbf{x}| > h^s, \end{cases}$$

definícióval adott simítófüggvényt használjuk, ahol $B_{h^s,d}$ a d dimenziós h^s sugarú gömb térfogatát jelöli. Fontos, hogy $\int_{\mathbb{R}^d} \eta_h = 1$, valamint $\eta_h * \cdot : V_h \rightarrow C(\mathbb{R}^d)$ lokális átlagolást jelent.

Az analízis első fontos tétele a következő [17]:

3.2.5 Tétel. *Ha $3s > d+2$, akkor van olyan $h_0 \in \mathbb{R}^+$, hogy minden olyan \mathcal{T}_h -ra, amelyre $\min\{\text{diam } K : K \in \mathcal{T}_h\} = h < h_0$ és minden $u, v \in V_h$ esetén teljesül, hogy*

$$|a_{\text{IP},s}(u, v) - a_\eta(u, v)| \lesssim h^{s-1}(1 + h^{3s-d-2})\|\nabla(\eta_h * u)\|\|\nabla(\eta_h * v)\|.$$

Ezt használva választ kaphatunk azonnal arra is, hogyan vezethetjük le az $a_{\text{IP},s}$ bilineáris formát:

- Használjuk a konform $a(\eta_h * u, \eta_h * v)$ bilineáris formát, amely azonos $a_\eta(u, v)$ -vel.
- Mivel a lokális átlagok kiszámítása miatt ez bonyolult alakú, használjuk helyette egy jó közelítését, ami a fenti tétel szerint éppen $a_{\text{IP},s}$.

A módszerben itt az a heurisztikus elem, hogy a simításhoz a lehető legegyszerűbb átlagolásoperátort választottuk.

A tétel választ ad arra a kérdésre is, hogy $a_{\text{IP},s}$ mikor elliptikus, hiszen a_η definíció szerint az, és legkisebb sajátértékei becsülhetők. A $3s > d + 2$ feltétel alapján be tudjuk tehát az s paraméter értékét állítani úgy, hogy $a_{\text{IP},s}$ elliptikus legyen. Így az ismert $s = 3$ korlát helyett jóval enyhébbet kapunk.

Az analízis egy eszköze Az analízis legfontosabb eszköze a disztribúcióelmélet. Az a_η bilineáris forma vizsgálatához az abban szereplő $\nabla(\eta_h * u)$ mennyiséget a következő módon alakíthatjuk át:

$$\nabla(\eta * u) = \eta_h * (\nabla u) = \eta_h * (\nabla_h u + \llbracket u \rrbracket) = \eta_h * \nabla_h u + \eta_h * \llbracket u \rrbracket.$$

Itt ∇u a disztribúciós, amelynek (mint Radon-mértéknek) Lebesgue-felbontását vettük, ahol ∇_h jelöli a résztartományonkénti gradiens operátort, $\llbracket u \rrbracket$ pedig a fenti mérték szinguláris részét.

Érdekes eredmény, hogy $d \geq 2$ esetén $\eta_h * \llbracket u \rrbracket$ nemcsak reguláris, hanem még folytonos is. Sőt részletes számolással a C konstans értékét is megkaphatjuk; $d = 2$ esetén $C = \frac{16}{3\pi^2} h^{-s}$, $d = 2$ esetén pedig $C = \frac{3}{5} h^{-s}$.

A $d = 1$ eset vizsgálatához [9] feltesszük, hogy az ugrás a nulla helyen van, azaz $u \in C(\Omega \setminus \{0\})$. Ekkor ∇u szinguláris része $\llbracket u \rrbracket(0) \cdot \delta$, ahol δ a nulla pontra koncentrált Dirac-disztribúció. Ekkor

$$\eta_h * \llbracket u \rrbracket = -\eta_h * (\llbracket u \rrbracket(0)\delta) = -\llbracket u \rrbracket(0)\eta_h,$$

vagyis

$$(\eta_h * \llbracket u \rrbracket, \eta_h * \llbracket v \rrbracket) = \llbracket u \rrbracket \llbracket v \rrbracket(0)(\eta_h, \eta_h) = \frac{1}{2h^s} \llbracket u \rrbracket \llbracket v \rrbracket(0),$$

amiből máris látszik az $a_{\text{IP},s}$ bilineáris forma utolsó tagjának alakja.

Az elmélet fő eredménye a következő [17]:

3.2.6 Tétel. *A 3.2.5 tétel feltételeivel az $a_{\text{IP},s}$ bilineáris formából kapott $u_{\text{IP},s}$ közelítés lokális átlaga kvázioptimális a $H_1(\Omega)$ -félnormában, azaz*

$$\|\nabla(u - \eta_h * u_{\text{IP},s})\| \lesssim \inf_{v_h \in \mathbb{P}_{h,\mathbf{k}}} \|u - \eta_h * v_h\|_1 + \mathcal{O}(h^{s-\frac{1}{2}}) + \max_j h_{\Omega_j}^d \|\eta_h * g - g_0\|.$$

A tétel alapján az utolsó kérdésre is választ adhatunk:

- Tekintsünk az $a_{\text{IP},s}$ bilineáris formát a fenti C együtthatókkal, és számítsuk ki a nemfolytonos u_{dG} közelítést.

- Vegyük ennek lokális átlagát, azaz számítsuk ki a $\eta_h * u_{\text{dG}}$ mennyiséget. Ez a H^1 -félnormában a megoldás kvázioptimális közelítése lesz.

Megjegyzések: További vizsgálatok szükségesek ahhoz, hogy az $\inf_{v_h \in \mathbb{P}_{h,\mathbf{k}}} \|u - \eta_h * v_h\|_1$ tagra a \mathbf{h} és \mathbf{k} paraméterek függvényében becslést adjunk. Hasznos lenne ugyanis a 3.2.6 tételben szereplő hibakorlátot explicitebb módon megadni.

Hasznos volna a módszerhez tartozó a posztteriori hibabecslést is adni. Ebből ugyanis a ma használt *hp*-módszerek alternatíváját lehetne kidolgozni; egy olyan algoritmust, ahol a finomítási eljárás korlátozás nélkül végrehajtható, ugyanakkor a természetes energianormában konvergens megoldást kapunk.

Numerikus kísérletek A fenti eljáráshoz csak egy dimenziós esetben végeztünk numerikus kísérleteket. Ekkor ugyanis explicit módon megadható az a_η bilineáris forma, ami így összehasonlítható a hagyományos $a_{\text{IP},s}$ bilineáris formával. Ez lehetővé teszi, hogy a 3.2.5 tételben szereplő közelítést közvetlenül is teszteljük. Emellett vizsgáltuk a 3.2.5 tételben állított konvergenciarendet is. A szimulációk mindkét esetben megerősítették az elméleti eredményeket.

4. fejezet

Galjorkin-módszerek törtrendű Poisson-feladatokra

A törtrendű diffúziós feladatok vizsgálatának kérdésköre gyakorlati megfigyelésekből indult. Kiderült ugyanis, hogy olyan folyamatok, amelyek dinamikáját korábban diffúzívnak gondolták, egyáltalán nem így viselkednek. Ilyen kísérleti eredményeket írtak le például különböző plazma állapotú anyagok mozgását, szennyeződések terjedését, zsákmányt kereső állatok mozgásának dinamikáját megfigyelve. Ezek alapján kritikusan kell tekintenünk sok hagyományos reakció-diffúzió modellre.

A szimulációk és különböző fizikai megfontolások alapján általánosan elfogadott, hogy a diffúziós egyenletben szereplő Laplace-operátor helyett ezekben az esetekben annak valamilyen hatványát kell alkalmazni. Ez persze így nem pontos, ugyanis a Laplace-operátor definíciójához meg kell adni annak értelmezési tartományát, amit a legtöbb gyakorlati esetben az előírt peremfeltétel típusa határoz meg, ld. 1. Példa. Sőt, még a

$$\begin{cases} (-\Delta)^\alpha u(\mathbf{x}) = f_0(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = 0 & \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{cases} \quad (4.0.1)$$

feladat sem korrekt kitűzésű. Ugyanis $(-\Delta)^\alpha$ „nem lokális” operátor, azaz valamilyen $(-\Delta)^\alpha u(\mathbf{x})$ kiszámításához szükség van u értékére \mathbf{x} egy környezetében. Hogy lehet valamilyen valós jelenség modelljeként korrekt módon kitűzni, és hatékonyan megoldani ilyen feladatokat? Ez volt a fő kérdés számunkra ezen a kutatási területen. Megjegyezzük, hogy ez a témakör az utóbbi években nagyon divatossá vált, számtalan publikáció látott napvilágot, a törtrendű differenciáloperátorokat hullámegyenletekben, illetve különböző nemlineáris feladatokban is alkalmazzák. Gyakran az idő szerinti deriváltról teszik fel, hogy törtrendű operátor. Mi ezzel az esettel nem foglalkoztunk, ugyanis nem látszik, hogy teljesülnek-e erre is a különböző megmaradási törvények. Megjegyezzük, hogy a törtrendű diffúziós egyenletek témaköre szorosan kapcsolódik az analízis egy régi fejezetéhez, a törtrendű analízishez. Itt azonban korántsem egyértelmű a törtrendű deri-

vált fogalma, másrészt már a véges differenciákkal adott numerikus közelítése is nagyon összetett.

4.1. Néhány korábbi eredmény

A feladatok kitűzése Sajnos, a numerikus megoldást vizsgáló szerzők gyakran figyelmen kívül hagyják azt az alapvető követelményt, hogy pontosan meg kell adni a megoldandó feladatot, és ha lehet, igazolni kell, hogy az korrekt kitűzésű. Neves folyóiratokban is több olyan cikk jelent meg, ahol a (4.0.1) probléma numerikus megoldását vizsgálják anélkül, hogy a peremfeltételekkel foglalkoznának. A peremfeltételek értelmezésének nehézsége az elméletből is látszik. Ha csupán alacsony rendben deriválható a keresett megoldás, akkor a vizsgált tartomány peremén nem is biztos, hogy értelme van a megoldás pontbeli értékeinek. A leginkább átlátható és valós modellre épülő megközelítés a [12] munkában található nemlokális analízis.

Véges differencia módszer Bár a dolgozat témakörétől kissé eltér, a Galjorkin-módszer motivációja mindenképp a véges differenciákkal kapott közelítés során adódó többféle probléma. A jelentős áttörés ezen a területen a [18] munka volt, ahol stabil és konvergens véges differencia közelítést írtak le. A nemlokális tulajdonság abban tükröződik, hogy a véges differenciákban az összes osztópontot figyelembe kell venni, és a megfelelő lineáris rendszerben kapott mátrix is telt lesz.

A leggyakrabban homogén Dirichlet-peremfeltételt tekintenek, amelyet a numerikus szimulációk során úgy vesznek figyelembe, hogy a tartomány határán és azon kívül is minden értéket nullának vesznek. Ebben a keretben a Neumann-peremfeltétel esetét nem is tudták kezelni.

Galjorkin-módszer Természetesen merül fel az ötlet, hogy Galjorkin-típusú diszkrétizációval is próbálkozzunk a numerikus megoldás során. A végeselem-közelítés több okból is hasznosabb a törtrendű egyenletek esetére. Egyrészt azért, mert komplexebb tartományon is végezhető közelítések, és a fentiekben is ismertetett adaptív eljárásokkal gyors konvergencia remélhető a klasszikus diffúziós operátor esetéhez hasonlóan. Másrészt a peremfeltétel beépítése a bilineáris formába teljesen természetes módon tehető meg, továbbá ezzel a folytonos probléma is könnyen látható módon korrekt kitűzésű.

Ennek ellenére a törtrendű diffúziós egyenletek megoldásának végeselem-közelítése kevésbé kidolgozott terület. Ennek fő oka valószínűleg egy elméleti nehézség, mégpedig az, hogy az (1.2.4) integrálátalakító formula csak speciális esetben áll rendelkezésre. Egyszerűbben kifejezve: szükség volna egy törtrendű Laplace-operátorra vonatkozó Green-formulára. Ehhez kapcsolódik a kétféle eddig leírt módszer egyike is: a [13] munkában egy dimenziós szituációban dolgozták ki a megfelelő elméletet és a hozzá tartozó numerikus módszert is. A másik megközelítés [22] tetszőleges dimenzióban működik,

ugyanakkor nagyon összetett. A lényege, hogy a vizsgált tartományra egy hengert emelve annak felszínén vett Dirichlet–Neumann-operátorral azonosítható a törtrendű deriválás operátora. A megfelelő nyom-tételek miatt itt törtrendű Szoboljev terekben kell az analízist és a hibabecslést elvégezni. Sőt, a hibabecslést (a dimenzionálisan bővített) henger-tartományon kapjuk, ahol a kiterjesztett feladat ki volt tűzve.

Egy általános ötlet: mátrixtranszfomráció Mind a véges differencia-módszerek, mind Galjorkin-módszerek esetén a következő, egyszerű eljárást javasolták: Ha a hagyományos, Dirichlet-peremfeltétellel ellátott Laplace operátor végeselem-diszkretizációjához az A_h mátrixot használjuk, akkor ennek törtrendű verziójához az A_h mátrix megfelelő hatványát kell majd használni. Ennek kapcsán hatékony eljárásokat írtak le mátrixhatványok kiszámításához [28].

4.2. Saját eredmények

4.2.1. Véges differencia-módszerek, korrekt kitűzésű feladatok

Az egy dimeziós esetben a [25] munkában a törtrendű diffúziós problémát a Dirichlet-, illetve a Neumann-peremfeltétel esetének megfelelően kiterjesztettük \mathbb{R} -re és ott igazoltuk, hogy a kiterjesztett probléma korrekt kitűzésű, valamint megoldásának az eredeti tartományra való leszűkítése olyan, hogy teljesíti a kívánt peremfeltételeket. Ehhez kapcsolódóan egy véges differencia módszert is megadtunk, igazoltuk annak konvergenciáját a $\|\cdot\|_\infty$ normában. Ezt részleteiben nem ismertetjük, mert nem kapcsolódik szorosan a dolgozat fő témaköréhez.

4.2.2. Galjorkin-módszer, mátrixtranszformáció

A [26] munkában az volt a célunk, hogy a mátrixtranszformáció módszerének helyességét igazoljuk, és annak konvergenciarendjét megadjuk. A bevezetőben említett ötlet alapján a (4.0.1) feladat megoldásának közelítését tehát az

$$u_{h,\alpha} = A_h^{-\alpha} \Pi_{0,h} f$$

formulával definiáljuk, ahol $\Pi_{0,h} : L_2(\Omega) \rightarrow V_h$ merőleges vetítés.

A módszer lényegét a következő diagramon foglaljuk össze:

$$\begin{array}{ccc} L_2(\Omega) & \xrightarrow{(-\Delta_{\mathcal{D}})^{-1}} & H_0^1(\Omega) \\ \Pi_{h,0} \downarrow & & \downarrow \Pi_{h,1} \\ V_h & \xrightarrow{A_h^{-1}} & V_h \end{array} \quad \begin{array}{ccc} L_2(\Omega) & \xrightarrow{(-\Delta_{\mathcal{D}})^{-\alpha}} & \mathbb{H}^\alpha(\Omega) \\ \Pi_{h,0} \downarrow & & \downarrow \\ V_h & \xrightarrow{A_h^{-\alpha}} & V_h \end{array} \quad (4.2.2)$$

Itt $\mathbb{H}^\alpha(\Omega)$ jelöli a (4.0.1) feladat $(-\Delta_{\mathcal{D}})^{-\alpha} : L_2(\Omega) \rightarrow L_2(\Omega)$ megoldóoperátorának értékkészleteként kapott Szoboljev-teret [22]. Mivel eleve csak az L_2 -normában vett konvergenciát igazoljuk, ezt minél pontosabban szeretnénk. A Laplace-operátorra vonatkozó Galjorkin-módszerre fennáll ugyanis, hogy ha a megoldás elég sima, akkor az L_2 -normában vett közelítés magasabb rendű, mint a természetes H^1 -normában vett. Ezt általánosítja ezen fejezet fő eredménye:

4.2.7 Tétel. *Tegyük fel, hogy a pontos $u = (-\Delta_{\mathcal{D}})^{-\alpha} f$ megoldásra $u \in H^{1+s}(\Omega)$. Ekkor a fenti $u_{h,\alpha} = A_h^{-\alpha} \Pi_{0,h} f$ numerikus megoldás kvázi-optimális az L_2 -normában, vagyis*

$$\|u - u_{h,\alpha}\|_0 \leq Ch^{\alpha(s+1)} \|f\|_0.$$

A bizonyítás alapötlete a következő eredmény [3], [6] felhasználása:

4.2.8 Tétel. *Ha A, \mathcal{E} pozitív, kompakt, önadungált operátorok valamilyen H Hilbert-téren és $\alpha \in [0, 1]$, akkor*

$$\|(A + \mathcal{E})^\alpha - A^\alpha\| \leq \|\mathcal{E}\|^\alpha.$$

A konkrét számítások végrehajtásával kapcsolatban nehézség, hogy az analízis arra az esetre vonatkozik, amikor a végeelem-tér bázisa ortogonális. Ezért a számítási algoritmus kissé összetettebb a szokásosnál:

- Kiszámítjuk valamilyen standard $\{\mathbf{b}_2\}$ végeelem-bázisban az (1.2.5) lineáris feladatban szereplő \mathbf{f} jobb oldalt, a B_2 tömegmátrixot (amelynek $[k, j]$ indexű eleme $(b_{2,j}, b_{2,k})$) és az A mátrixot.
- Cholesky-felbontást használva kiszámítjuk azt az S^{-1} mátrixot, amelyre $SB_2S^T = I$, azaz $B_2 = S^{-1}(S^T)^{-1}$.
- Transzormáljuk a jobb oldalt: $\mathbf{f}_1 := S^{-1}\mathbf{f}$ és a lineáris feladatban szereplő mátrixot: $A_1 = S^{-1}A(S^T)^{-1}$.
- Megoldjuk az $A_1^\alpha \mathbf{x}_1 = \mathbf{f}_1$ egyenletet, amely az ortogonalizált bázisban adja meg a közelítést.
- $\mathbf{x}_2 = (S^T)^{-1}\mathbf{x}_1$ lesz a keresett közelítés a „természetes” $\{\mathbf{b}_2\}$ bázisban.

Numerikus kísérletek A tesztfeladat az $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1) \setminus [0, 1] \times [0, -1]$ tartományon definiált

$$\begin{cases} (-\Delta)^\alpha u(\mathbf{x}) = \lambda_1 \Phi_1(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(\mathbf{x}) = 0 & \mathbf{x} \in \partial\Omega \end{cases} \quad (4.2.3)$$

probléma volt, ahol λ_1 jelöli a $-\Delta_{\mathcal{D}}$ operátor legkisebb sajátértékét, Φ_1 pedig az ehhez tartozó sajátfüggvényt. Ekkor

$$(-\Delta_{\mathcal{D}})^\alpha(\lambda_1^{1-\alpha}\Phi_1) = \lambda_1^{1-\alpha}(-\Delta_{\mathcal{D}})^\alpha\Phi_1 = \lambda_1^{1-\alpha}(\lambda_1^\alpha)^\alpha\Phi_1 = \Phi_1,$$

vagyis az $u = (\lambda_1)^{1-\alpha}\Phi_1$ függvény a (4.2.3) feladat egyértelmű megoldása.

A teszt végrehajtásához a λ_1 sajátértéket külön, finom felosztáson közelítettük inverz iterációval. Egy egyenletes négyzet-felosztáson a standard bilineáris Lagrange-bázisfüggvényeket használtuk, a Cholesky-felbontást pedig a Matlab beépített szubrutinja számolta.

Az A_2^α mátrixhatványt a sajátérték-felbontás alapján számítottuk ki szintén a Matlab-függvény használatával.

Mivel $\Phi_1 \in H^{\frac{5}{3}}(\Omega)$ (ez a maximális Szoboljev-index), ezért a tétel alapján $\alpha = 0,7$ esetén $\frac{3,5}{3} \approx 1,17$ a várt konvergenciarend az L_2 -normában. Ehhez képest kisebbet kaptunk, a rend a numerikus kísérletek során 1,03 - 1,07 volt.

Azt is ellenőriztük, hogy a Cholesky-felbontás kiszámítása a számítási idő csak nagyon kis részét teszi ki.

Megjegyzések: 1. Létezik a mátrixhatványt közvetlenül kiszámító szubrutin is, ez azonban nagyon pontatlannak bizonyult.

2. A kísérletben kapott alacsonyabb konvergenciarend lehet annak következménye is, hogy az analitikus megoldást sem adtuk meg pontosan.

3. A mátrixhatványozásra szolgáló hatékony algoritmusok kidolgozása a numerikus lineáris algebra ma is sokat vizsgált témaköre.

Jelölések

$\Omega \subset \mathbb{R}^d$: a tartomány, ahol a megoldandó PDE adott

\mathcal{T}_h : az Ω tartomány egy felosztása

K, K_j : a \mathcal{T}_h felosztásban szereplő egy-egy résztartomány, $K_0 = \Omega^c$

$f_{j,k} = \bar{K}_k \cap \bar{K}_j$: a K_j és K_k résztartományok közös lapja

$\boldsymbol{\nu}_j$: a K_j résztartományból kifelé mutató normális

$\hat{K} = \{\text{int} \cup_{j \neq 0} \bar{K}_j : \bar{K} \cap \bar{K}_j \neq \emptyset\}$: a K résztartomány nyoma

$\llbracket v \rrbracket_{f_{j,k}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\nu}_j v(\mathbf{x}_j) + \boldsymbol{\nu}_k v(\mathbf{x}_k)$: az $f_{j,k}$ lapon értelmezett ugrás

$\mathcal{F} = \bigcup_{0 \leq j \neq k} f_{j,k}$: résztartományok közös lapjainak összessége

V_h : végelelem-tér

$\Pi_h : L_2(\Omega) \rightarrow V_h$: végelelem interpoláció a V_h térre.

(\cdot, \cdot) : az $[L_2(\Omega)]^n$ térbeli skalárszorzat

$\|u\|_{s,K} = \|u\|_{H^s(K)}, \quad \|u\|_s = \|u\|_{H^s(\Omega)}$

$H(\text{curl}, \Omega) = \{\mathbf{u} \in [L_2(\Omega)]^3 : \nabla \times \mathbf{u} \in [L_2(\Omega)]^3\}, \|u\|_{\text{curl}} = \sqrt{\|\mathbf{u}\|_0^2 + \|\nabla \times \mathbf{u}\|_0^2}$

$s_1 \lesssim s_2$: van olyan $C > 0$ felosztásparámétertől független konstans, hogy $s_1 \leq C s_2$.

Köszönetnyilvánítás

Itt azoknak fejezem ki köszönetemet, akiknek javaslatát követve a fenti érdekes témákkal megismerkedtem, és akikkel együtt dolgoztam.

Elsőként Lagzi István Lászlónak (BME, Fizikai Kémia Tanszék) tartozom ezzel, akivel a kutatási időszak elején sokat vizsgáltuk és modelleztük a Liesegang-típusú mintázatok képződésének jelenségét. A hatályos szabályzat miatt az ebből készült munkák jelentős részét a habilitációs eljárás során nem lehetett figyelembe venni. Tőle kaptam a javaslatot és ehhez kapcsolódó naprakész irodalomjegyzéket a törtrendű egyenletek problémakörének gyakorlati kérdéseivel kapcsolatban, amelyből a jelenlegi kutatás indult.

Másodszor Jaap van der Vegt (University of Twente) segítségét köszönöm meg, aki a Maxwell-egyenletek numerikus megoldásának témakörére, az a poszteriori hibabecslések lényeges szerepére hívta fel a figyelmemet, továbbá sokat tanultam tőle a nemfolytonos Galjorkin-módszerekkel kapcsolatban. Az általa létrehozott csoport munkájába bekapcsolódva volt lehetséges az összetett numerikus szimulációkat tartalmazó munkákat elkészíteni. Számos gyakorlati tanáccsal is segítette a munkámat mind progamozásbeli részletek, mind tudományos munkák, pályázatok elkészítésével kapcsolatban.

Végül Szekeres Béla doktoranduszomnak mondok köszönetet, akinek a törtrendű diffúziós feladattal kapcsolatos ötletei és a mátrixtranszformációs módszer alkalmazhatóságának felismerése ösztökélt arra, hogy többet foglalkozzam ezzel a területtel.

Irodalomjegyzék

- [1] M. Ainsworth and J. T. Oden. *A posteriori error estimation in finite element analysis*. Pure and Applied Mathematics. Wiley-Interscience [John Wiley & Sons], New York, 2000.
- [2] M. Ainsworth and R. Rankin. Fully computable error bounds for discontinuous Galerkin finite element approximations on meshes with an arbitrary number of levels of hanging nodes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 47(6):4112–4141, 2010.
- [3] T. Ando. Comparison of norms $|||f(A) - f(B)|||$ and $|||f(|A - B|)|||$. *Math. Z.*, 197(3):403–409, 1988.
- [4] D. N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn, and L. D. Marini. Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39(5):1749–1779 (electronic), 2001/02.
- [5] I. Babuška and W. C. Rheinboldt. Analysis of optimal finite-element meshes in \mathbf{R}^1 . *Math. Comp.*, 33(146):435–463, 1979.
- [6] M. Š. Birman, L. S. Kopliencko, and M. Z. Solomjak. Estimates of the spectrum of a difference of fractional powers of selfadjoint operators. *Izv. Vysš. Učebn. Zaved. Matematika*, (3(154)):3–10, 1975.
- [7] S. C. Brenner, L. Owens, and L.-Y. Sung. A weakly over-penalized symmetric interior penalty method. *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 30:107–127, 2008.
- [8] A. Buffa and C. Ortner. Compact embeddings of broken Sobolev spaces and applications. *IMA J. Numer. Anal.*, 29(4):827–855, 2009.
- [9] G. Csörgő and F. Izsák. Energy norm error estimates for averaged discontinuous Galerkin methods in 1 dimension. *Int. J. Numer. Anal. Model.*, 11(3):567–586, 2014.
- [10] D. A. Di Pietro and A. Ern. Discrete functional analysis tools for discontinuous Galerkin methods with application to the incompressible Navier-Stokes equations. *Math. Comp.*, 79(271):1303–1330, 2010.

- [11] D. A. Di Pietro and A. Ern. *Mathematical aspects of discontinuous Galerkin methods*, volume 69 of *Mathématiques & Applications (Berlin) [Mathematics & Applications]*. Springer, Heidelberg, 2012.
- [12] Q. Du, M. Gunzburger, R. B. Lehoucq, and K. Zhou. A nonlocal vector calculus, nonlocal volume-constrained problems, and nonlocal balance laws. *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.*, 23(03):493–540, 2013.
- [13] V. J. Ervin and J. P. Roop. Variational formulation for the stationary fractional advection dispersion equation. *Numer. Meth. Part. D. E.*, 22(3):558–576, 2006.
- [14] D. Harutyunyan, F. Izsák, J. J. W. van der Vegt, and M. A. Botchev. Adaptive finite element techniques for the Maxwell equations using implicit a posteriori error estimates. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 197(17-18):1620–1638, 2008.
- [15] T. Horváth and F. Izsák. Implicit a posteriori error estimation using patch recovery techniques. *Cent. Eur. J. Math.*, 10(1):55–72, 2012.
- [16] F. Izsák, D. Harutyunyan, and J. J. W. van der Vegt. Implicit a posteriori error estimates for the Maxwell equations. *Math. Comp.*, 77(263):1355–1386, 2008.
- [17] F. Izsák. Energy norm error estimates for averaged discontinuous Galerkin methods: Multidimensional case. *Computers & Mathematics with Applications*, 2015. <http://dx.doi.org/10.1016/j.camwa.2015.06.008>.
- [18] M. M. Meerschaert and C. Tadjeran. Finite difference approximations for fractional advection-dispersion flow equations. *J. Comput. Appl. Math.*, 172(1):65–77, 2004.
- [19] H. Mirzaee, J. King, J. Ryan, and R. Kirby. Smoothness-increasing accuracy-conserving filters for discontinuous Galerkin solutions over unstructured triangular meshes. *SIAM J. Sci. Comput.*, 35(1):A212–A230, 2013.
- [20] H. Mirzaee, J. K. Ryan, and R. M. Kirby. Smoothness-increasing accuracy-conserving (SIAC) filters for discontinuous Galerkin solutions: Application to structured tetrahedral meshes. *J. Sci. Comput.*, 58(3):690–704, 2014.
- [21] W. F. Mitchell and M. A. McClain. A comparison of *hp*-adaptive strategies for elliptic partial differential equations. *ACM Trans. Math. Software*, 41(1):Art. 2, 39, 2014.
- [22] R. Nochetto, E. Otárola, and A. Salgado. A PDE approach to fractional diffusion in general domains: A priori error analysis. *Found. Comput. Math.*, 15:733–791, 2015.

- [23] D. Sármany, F. Izsák, and J. J. W. van der Vegt. Optimal penalty parameters for symmetric discontinuous Galerkin discretisations of the time-harmonic Maxwell equations. *J. Sci. Comput.*, 44(3):219–254, 2010.
- [24] D. Schötzau and C. Schwab. Exponential convergence for hp-version and spectral finite element methods for elliptic problems in polyhedra. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 25(9):1617–1661, 2015.
- [25] B. J. Szekeres and F. Izsák. A finite difference method for fractional diffusion equations with Neumann boundary conditions. To appear in *Open Mathematics*.
- [26] B. J. Szekeres and F. Izsák. Finite element approximation of fractional order elliptic boundary value problems. To appear in the *Journal of Computational and Applied Mathematics*.
- [27] J. J. W. van der Vegt, F. Izsák, and O. Bokhove. Error analysis of a continuous-discontinuous Galerkin finite element method for generalized 2D vorticity dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45(4):1349–1369, 2007.
- [28] Q. Yang, I. Turner, F. Liu, and M. Ilić. Novel numerical methods for solving the time-space fractional diffusion equation in two dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.*, 33(3):1159–1180, 2011.
- [29] O. C. Zienkiewicz and J. Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. I. The recovery technique. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 33(7):1331–1364, 1992.
- [30] O. C. Zienkiewicz and J. Z. Zhu. The superconvergent patch recovery and a posteriori error estimates. II. Error estimates and adaptivity. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 33(7):1365–1382, 1992.